

# 量子コンピュータによる最適化アルゴリズムの概要と基礎

---

東京大学大学院理学系研究科 量子ソフトウェア寄付講座 大久保毅

# コンテンツ

---

- イントロダクション
  - 量子コンピュータ
  - 最適化問題
- 量子アニーリングの基礎
- QAOAの基礎
- まとめ

量子コンピュータ

# 古典コンピュータと量子コンピュータの情報単位

## 古典コンピュータ

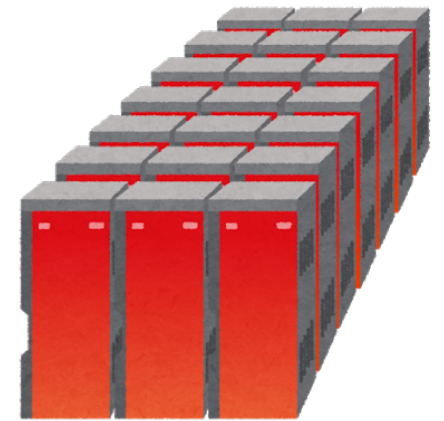
(例えば) 0と1の2状態 (bit) で情報 (状態) を表す

1 bit: 状態は"0" or "1"

2 bits: 状態は"00", "01", "10", "11"

⋮

$N$  bits: 状態は全部で $2^N$ 個



## 量子コンピュータ

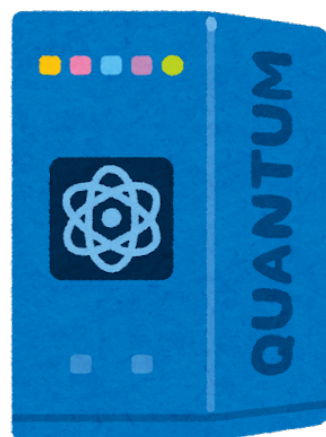
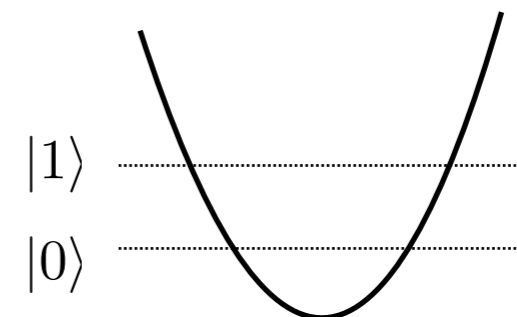
(例えば)  $2^N$  "準位"を持つ量子系 (qubit) で情報を表す

1 qubit: 状態は"基底"  $|0\rangle, |1\rangle$  の任意の重ね合わせ (線形結合)

### 重ね合わせの例

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow |\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

\*  $\alpha, \beta$  は一般に複素数



# 量子ビットの多体系

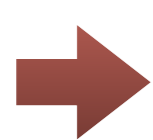
1 qubit

- 1つの量子ビットの状態は2つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle, |1\rangle$

2次元ベクトル

重ね合わせ? \*  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$



$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

確率  $P(|0\rangle) = |\alpha|^2$  で状態  $|0\rangle$

確率  $P(|1\rangle) = |\beta|^2$  で状態  $|1\rangle$

$$= 1 - P(|0\rangle)$$

を観測

2 qubits

- 2つの量子ビット系の状態は4つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle$

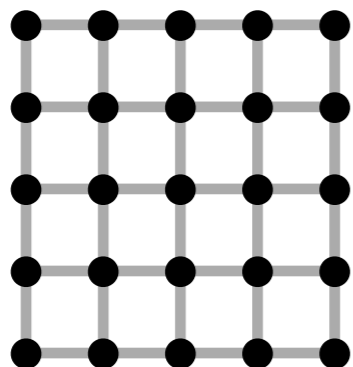
4次元ベクトル

(簡略化した表現:  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ )



$$|\Psi\rangle = C_{00}|00\rangle + C_{01}|01\rangle + C_{10}|10\rangle + C_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{01} \\ C_{10} \\ C_{11} \end{pmatrix}$$

$N$  qubits



状態を表すベクトルの次元  $2^N$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

指数関数的に大きい!

$$2^{10} = 1024 \sim 10^3$$

$$2^{20} \sim 10^6, 2^{100} \sim 10^{30}$$

# 量子状態の古典計算困難性

量子状態の従う運動方程式 = シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle$$

$|\Psi\rangle$  : 量子状態 ( $2^N$ 次元のベクトル)

$\mathcal{H}$  : ハミルトニアン ( $2^N \times 2^N$ の行列)

(時間に依存しない場合)

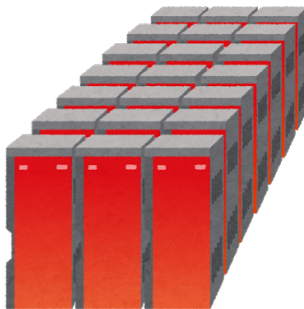
$$\mathcal{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

$E$  : エネルギー (数字)

指数関数的に大きな次元を持つベクトルの運動方程式

古典コンピュータでこの運動方程式を厳密に解くには、

膨大なメモリと膨大な計算時間が必要



スパコン富岳を用いても、50 qubits程度しか計算できない

量子コンピュータ = 高度に制御された量子系

古典計算機では計算できないことを

”計算”できる可能性!



# 最適化問題

# 最適化問題

---

コスト関数： $F(\vec{\theta})$

パラメタ： $\vec{\theta} = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_M\}$

最適化問題 = コスト関数を最小にするパラメタを探す

\*パラメタが取れる値には制約がある場合もある

例：

- 最小二乗法

- 数値データに対して残差の二乗の和が最小になるような直線・曲線を探す

$$F(\vec{\theta}) = \sum_i \left[ y_i - f(x_i; \vec{\theta}) \right]^2$$

- 量子化学、量子物理

- エネルギーが最小になる量子状態を探す

$$F(\vec{\theta}) = \langle \psi(\vec{\theta}) | \mathcal{H} | \psi(\vec{\theta}) \rangle$$

- 巡回セールスマン問題

- 全ての都市を巡る経路のうち、移動コストが最小になる経路を探す

$$F(\vec{\theta}) = \sum_{(i,j)} w_{ij}$$



# 組み合わせ最適化問題

## 組み合わせ最適化問題

離散的な解の候補からコスト関数を最小にするものを探す最適化問題

### Max cut 問題

与えられたグラフ内の頂点を、**お互いをつなぐ辺の数が最大**になるように二つのグループに分ける

\*辺に重みがある場合：重み付きMax-cut問題

1つ目のグループ：  $x_i = 0$

2つ目のグループ：  $x_i = 1$

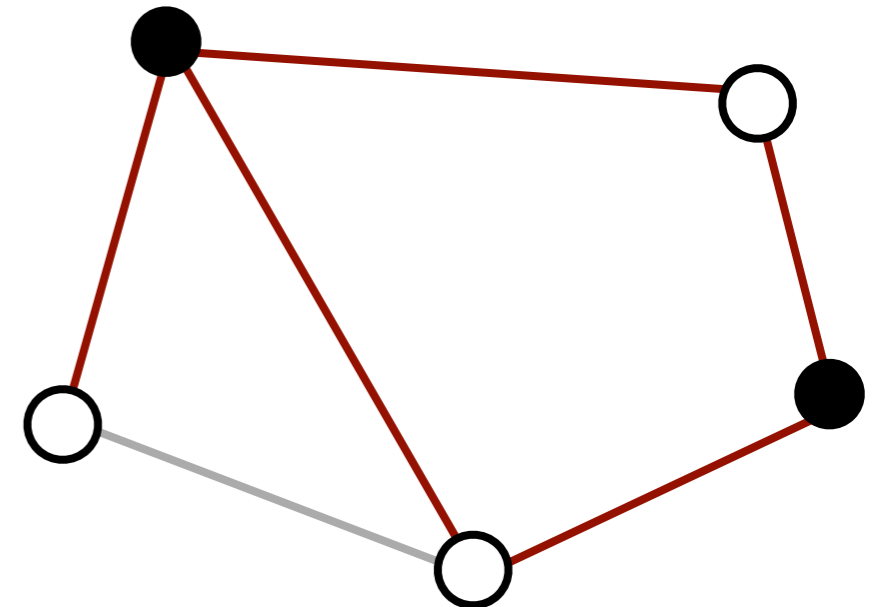
➡ コスト関数

$$F = - \sum_{(i,j) \in \text{Edge}} x_i(1 - x_j)$$

\*重み付きの場合

$$F = - \sum_{(i,j) \in \text{Edge}} w_{ij} x_i(1 - x_j)$$

$$x_i(1 - x_j) = \begin{cases} 1 & (x_i = 1, x_j = 0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$



# 組み合わせ最適化問題の困難

Max-cut問題 → NP困難 という計算量クラスに属する

(古典コンピュータでは)、問題サイズ  $N$  (頂点の数) に対して、  
答え得るための計算量・時間が  $N$  の多項式に収まるアルゴリズムがない

Cf.  $P \neq NP$  予想

→ 大きな  $N$  の問題を解くためには、膨大な計算が必要

\*典型的には  $N$  の指数関数


多くの組み合わせ最適化問題がNP困難に属する

どう解く？

→ なんらかのアルゴリズムでそこそこ良い解 (近似解) を求める

一つのやり方

# 組み合わせ最適化問題とイジング模型

組み合わせ最適化問題  統計物理学のイジング模型と関係

## イジング模型

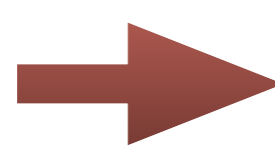
$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j$$

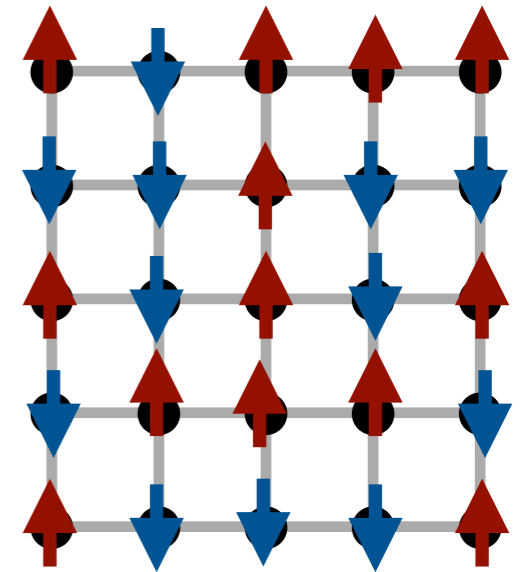
$S_i = \pm 1$  : イジングスピン  
 $J_{ij}$  : 相互作用

例：重み付きmax-cut問題

$$F = - \sum_{(i,j) \in \text{Edge}} w_{ij} x_i (1 - x_j) \quad x_i = 0, 1$$

$S_i = 2x_i - 1$  と変換

  $F = \frac{1}{4} \sum_{(i,j) \in \text{Edge}} w_{ij} S_i S_j + C$



正方格子イジング模型

組み合わせ最適化問題 → イジング模型の最低エネルギーを求める問題

# 量子アニーリングの基礎

# アニーリングによる最適化

## アニーリング (= 焼きなまし)

金属材料など

(十分な) 高温からゆっくりと冷却していくことで、  
歪みや欠陥が少ない“綺麗な”材料を作る

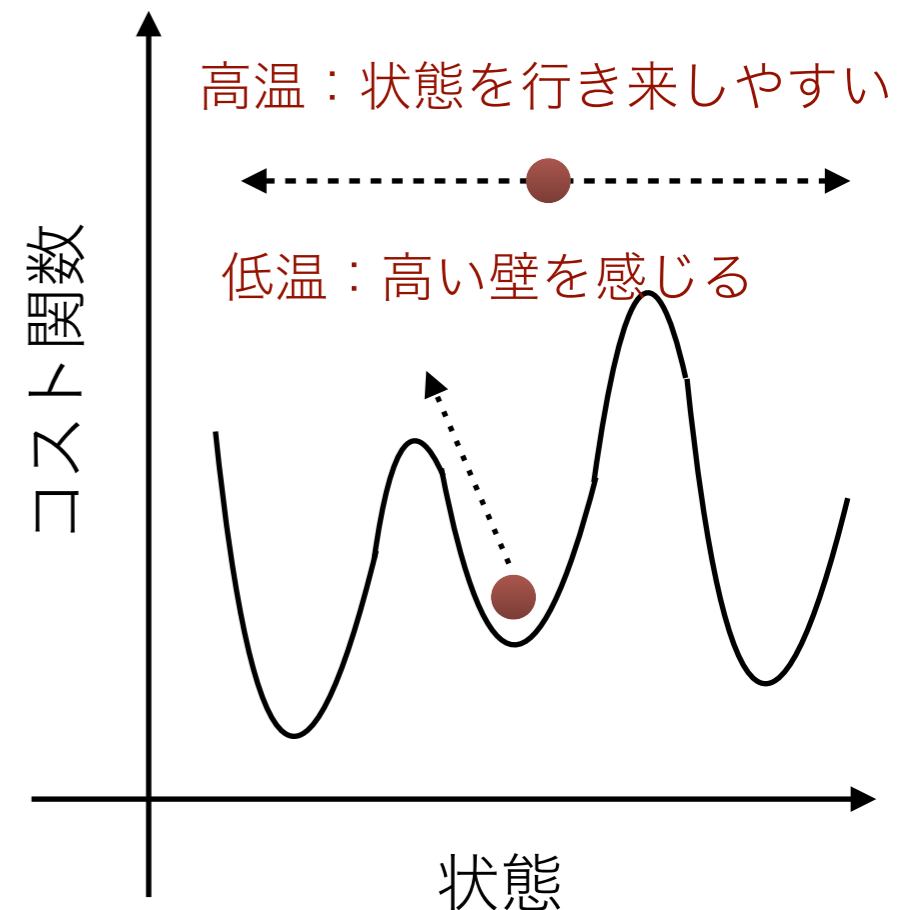
➡ 最適化問題への応用

## シミュレーテッドアニーリング

(古典) 計算機上で、“温度”パラメタ  
 $T$ を徐々に変化させてコスト関数  $H_0$   
の最小値を探す乱沢アルゴリズム

例：  $\Delta H_0 =$  コスト関数の差

$$\text{状態の遷移確率} = \begin{cases} 1 & (\Delta H_0 < 0) \\ e^{-\Delta H_0/T} & (\Delta H_0 \geq 0) \end{cases}$$



# 量子アニーリング

T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* 58, 5355 (1998).

系のパラメタをゆっくりと変化させ  
徐々に、欲しい系にする

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \Gamma(t)\mathcal{H}_1$$

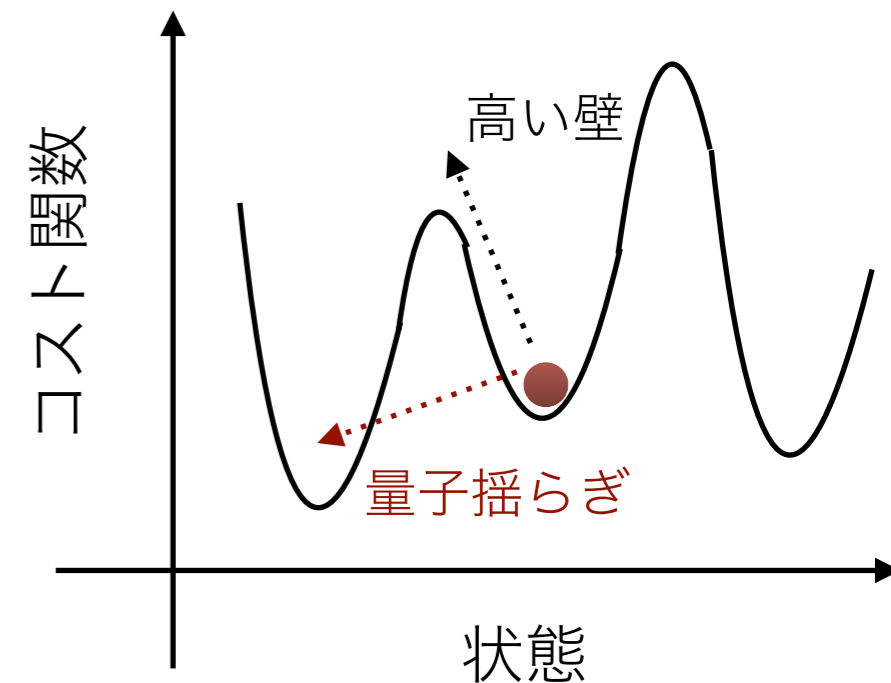
元のコスト関数

量子揺らぎ

$t = 0$  :  $\Gamma(t) =$ とても大

長時間 :  $\Gamma(t) \rightarrow 0$

素朴なアイデア



量子系は、初期状態からシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle$$

に従って、時間発展

長時間で、コスト関数の最小値  
に対応する状態が実現？

# 量子アニーリングと断熱時間発展

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \Gamma(t)\mathcal{H}_1 \quad \longrightarrow \quad \mathcal{H} = \frac{t}{\tau}\mathcal{H}_0 + \left(1 - \frac{t}{\tau}\right)\mathcal{H}_1$$

少し変形

$$t = 0 : \mathcal{H} = \mathcal{H}_1$$

$$t = \tau : \mathcal{H} = \mathcal{H}_0$$

時間間隔  $\tau$  で  
系を  $H_0$  に変化させる

## 断熱定理 (ざっくり)

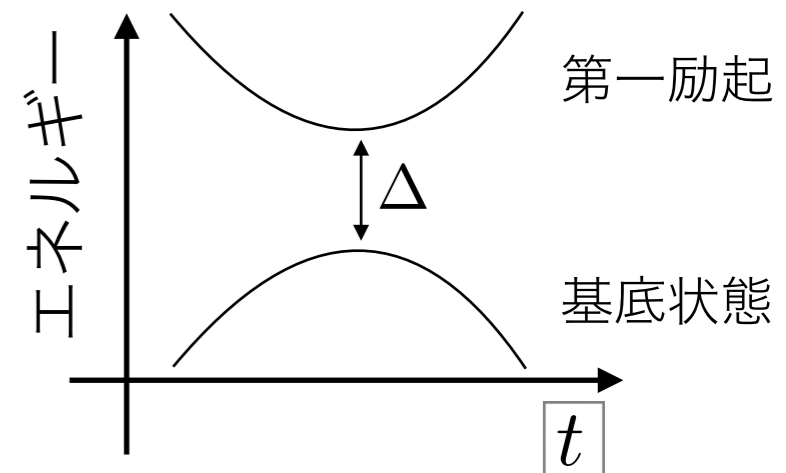
初期状態が  $H_1$  の最低エネルギー状態のとき  
 $\tau$  が十分に大きい (系の変化が十分にゆっくりの) 場合には、  
 $t = \tau$  で、 $H_0$  の最低エネルギー状態になる

\*どれくらいゆっくり?

最低エネルギー状態 (**基底状態**) と二番目低い状態  
(**第一励起状態**) との**最小のエネルギー差  $\Delta$**  で決まる

$$\tau \sim \frac{1}{\Delta^2}$$

\* $\Delta$  が小さいと、ゆっくり  
変化させる必要がある



# 量子ビットでの量子アニーリング

## 横磁場イジング模型

コスト関数：  
(イジング相互作用で表現)

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i,j} J_{ij} Z_i Z_j$$

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$Z_i Z_j |00\rangle = |00\rangle$$

$$Z_i Z_j |01\rangle = -|10\rangle$$

$$Z_i Z_j |10\rangle = -|01\rangle$$

$$Z_i Z_j |11\rangle = |11\rangle$$

量子揺らぎ：  
("横磁場")

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_i X_i$$

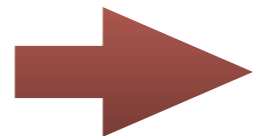
$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_i \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + |1\rangle)$$

$$X_i \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle) = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$$

重ね合わせ状態が基底状態

初期状態を $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の  
重ね合わせ状態にして  
ゆっくり時間発展



コスト関数の  
最小値を与え  
る状態が実現

## \* 実用上の問題

- 解きたい問題をどうイジング相互作用で表現するか
  - エネルギー差 $\Delta$ をできるだけ大きくした方が有利



# 実機での量子アニーリング

超伝導フラックス量子ビットによる横磁場イジング模型の実現

➡ 2011年にカナダのD-Wave社が商用化

多数量子ビット系のダイナミクスとして、  
量子アニーリングを実現できる



現在では5000 qubit以上の規模 ➡ 古典コンピュータに勝てる？

課題：

- 量子的な相関（コヒーレンス）が長時間は続いていない

➡ 理想的な量子アニーリングが実現しているわけではない

- 5000 qubit全てが密に結合してはいない

➡ 5000スピン相当の複雑な組合せ最適化問題が  
解ける訳ではない

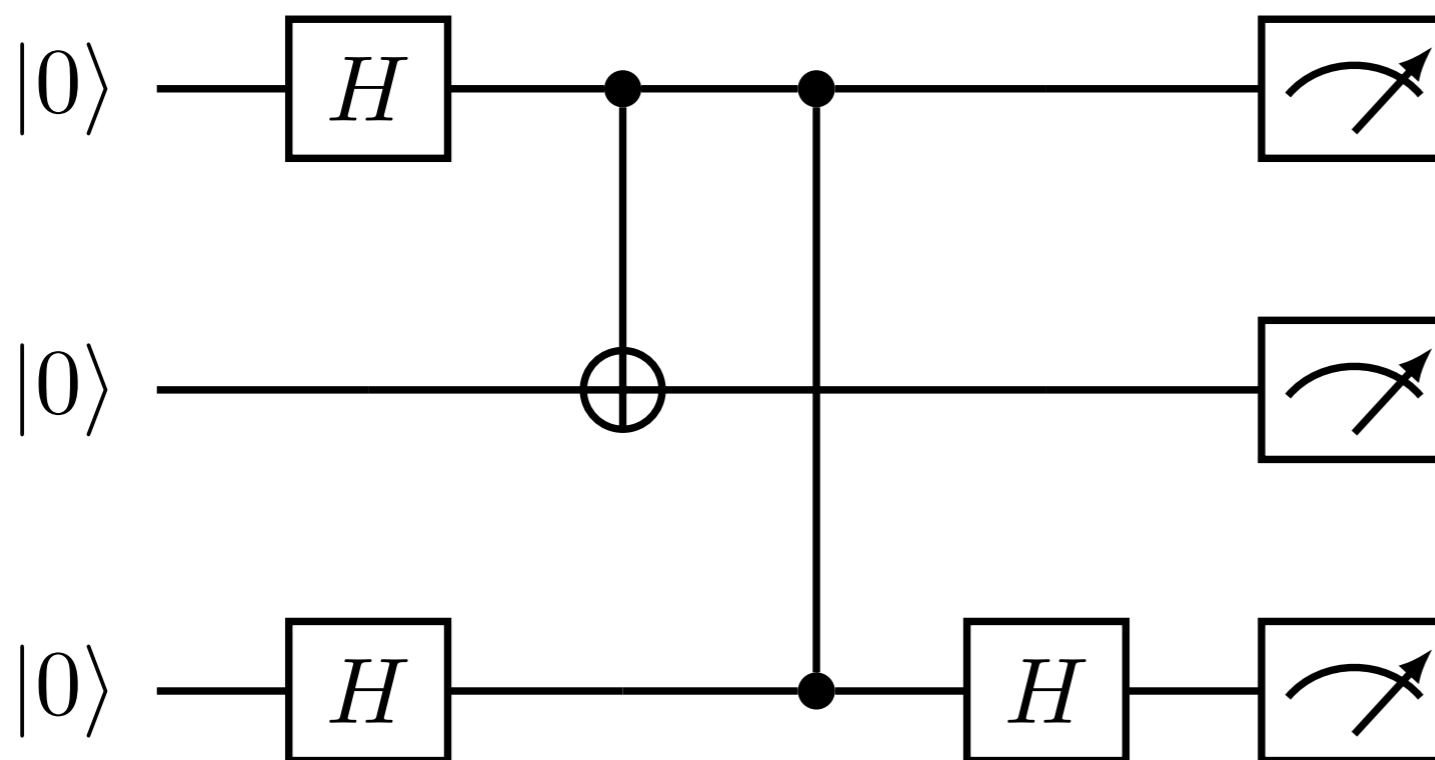
# Quantum Approximate Optimization Algorithm

## QAOA の基礎

# 量子コンピュータと量子回路

量子回路：量子ビットに演算するゲート操作の設計図

- 量子ビットの初期状態を準備
- 左から順番に「量子ゲート」を演算する
  - 量子ゲートはユニタリ行列  $UU^\dagger = U^\dagger U = I$
  - 1qubit、または2qubitに作用するものが基本
- 最後に「測定」して情報（計算結果）を得る

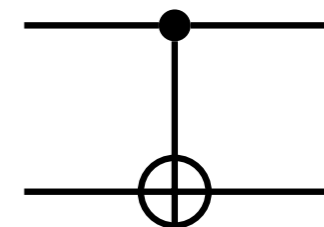


- $H$  (Hadamard) ゲート



重ね合わせ状態を生成

- Controlled-NOTゲート



量子ビット間にもつれを生成

# 量子回路での時間発展

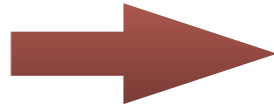
## 横磁場イジング模型

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \Gamma \mathcal{H}_1$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i,j} J_{ij} Z_i Z_j \quad \mathcal{H}_1 = - \sum_i X_i$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle$$



時刻  $t$  の量子状態

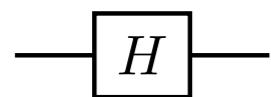
$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-it\mathcal{H}/\hbar} |\Psi(t=0)\rangle \\ &= e^{-it(\mathcal{H}_0 + \Gamma\mathcal{H}_1)/\hbar} |\Psi(t=0)\rangle \end{aligned}$$

$t$  が十分に小さいとき (短時間の時間発展)

$$|\Psi(t)\rangle \simeq e^{-it\mathcal{H}_1/\hbar} e^{-it\mathcal{H}_0/\hbar} |\Psi(t=0)\rangle$$

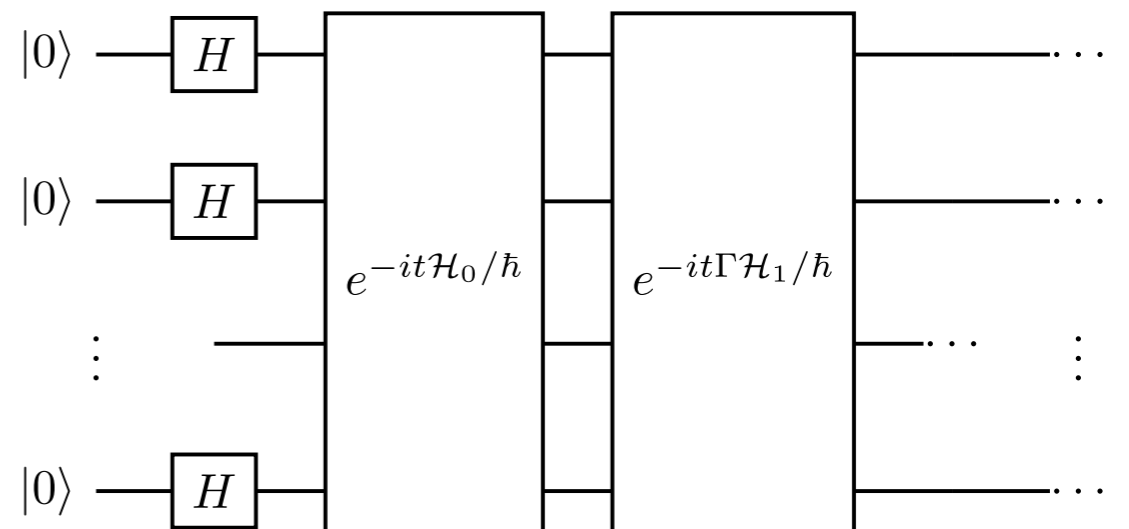
(鈴木・トロッター分解)

\*アダマールゲート: **重ね合わせ状態**を生成



$$H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

\*横磁場項の最低エネルギー状態



# 時間発展による基底状態の近似

時間変化するハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \Gamma(t)\mathcal{H}_1$$

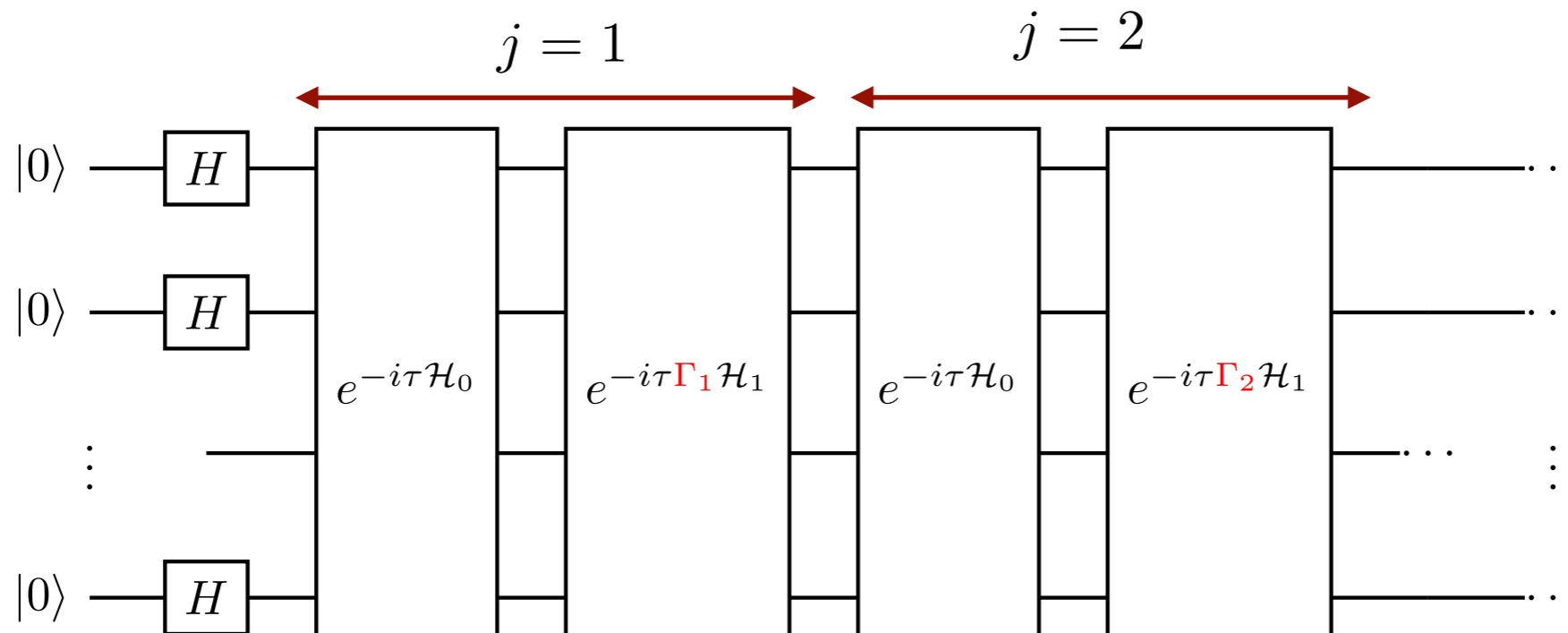
時間  $t$  を  $M$  分割:  $\tau = t/(\hbar M)$

分割点での横磁場:  $\Gamma_j = \Gamma(\tau\hbar j)$

➔  $|\Psi(t)\rangle \simeq e^{-i\tau\Gamma_M\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} \dots e^{-i\tau\Gamma_2\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} e^{-i\tau\Gamma_1\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} |\Psi(t=0)\rangle$

\*横磁場の時間変化 =  $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_M\}$

量子アニーリングのような断熱時間発展を記述する量子回路

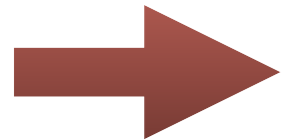


# Quantum approximate optimization algorithm (QAOA)

E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, [arXiv:1411.4028](https://arxiv.org/abs/1411.4028) (2014).

量子アニーリング：良い答えを得るには**長時間の時間発展が必要**

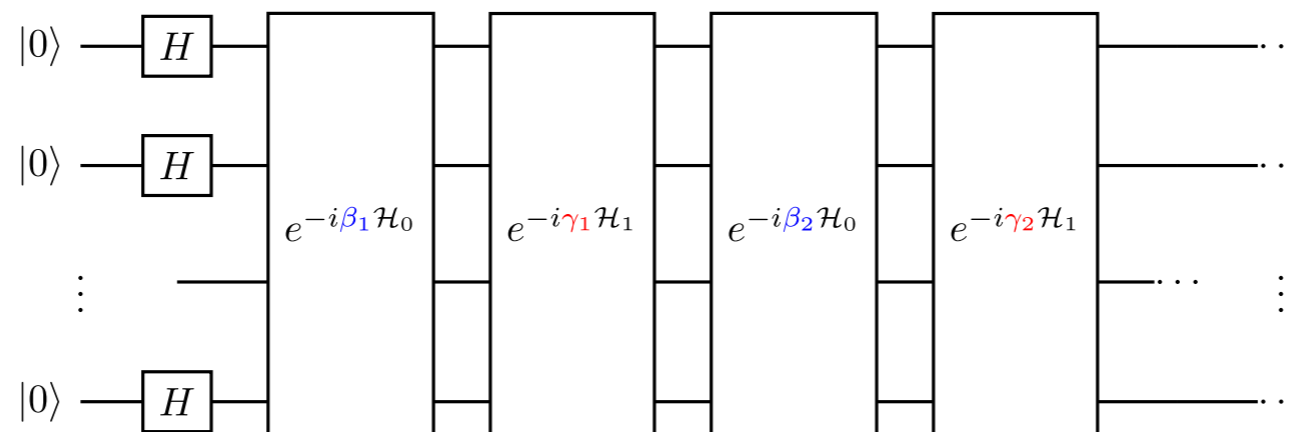
$$|\Psi(t)\rangle \simeq e^{-i\tau\Gamma_M\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} \dots e^{-i\tau\Gamma_2\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} e^{-i\tau\Gamma_1\mathcal{H}_1} e^{-i\tau\mathcal{H}_0} |\Psi(t=0)\rangle$$



短い時間発展 (=少ないゲート操作) で良い答えを探す？

各“パーツ”の発展時間をパラメタとした量子状態

$$|\Psi(\{\beta_j\}, \{\gamma_j\})\rangle = e^{-i\gamma_M\mathcal{H}_1} e^{-i\beta_M\mathcal{H}_0} \dots e^{-i\gamma_2\mathcal{H}_1} e^{-i\beta_2\mathcal{H}_0} e^{-i\gamma_1\mathcal{H}_1} e^{-i\beta_1\mathcal{H}_0} |\Psi(t=0)\rangle$$



パラメタは**コスト関数 $\mathcal{H}_0$ の期待値**小さくするように最適化

$$\langle \Psi(\{\beta_j\}, \{\gamma_j\}) | \mathcal{H}_0 | \Psi(\{\beta_j\}, \{\gamma_j\}) \rangle$$

# 実機でのQAOA

QAOAでのパラメタ最適化は、**量子・古典ハイブリッド計算**で実行可能

現在実現している・近未来に実現する量子コンピュータ：**誤り訂正がない**

**NISQ:** Noisy Intermediate-Scale Quantum computer

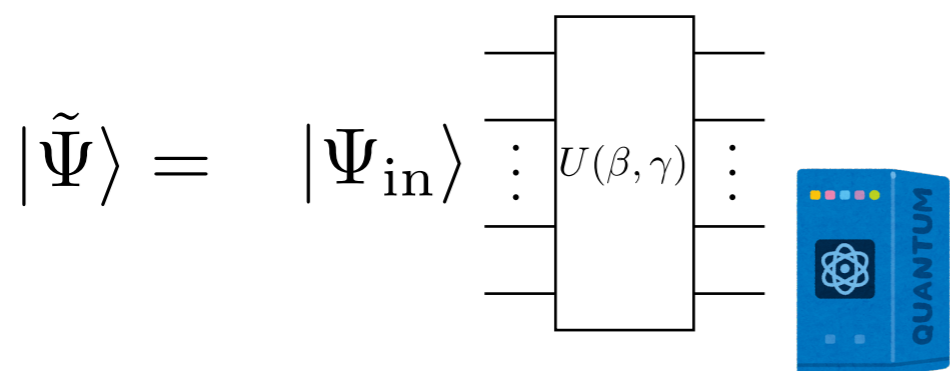
- 量子ゲートの演算や測定に**種々のノイズが含まれる**
- そのため、量子性を保って**演算できる数に制限が存在**

➡ NISQで期待値を計算し、パラメタの変化は古典コンピュータで計算

$$F = \langle \Psi(\{\beta_j\}, \{\gamma_j\}) | \mathcal{H}_0 | \Psi(\{\beta_j\}, \{\gamma_j\}) \rangle$$

## NISQ

波動関数 = **量子回路**

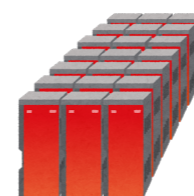


- コスト関数
- その微分

新しい  $\theta$

## 古典コンピュータ

コスト関数を低くするような  
新しいパラメタ  $\beta_i, \gamma_i$  を提案



$$\beta_i^{\text{new}} = \beta_i + \eta \frac{\partial F}{\partial \beta_i}$$

# まとめ

---

- 組み合わせ最適化問題
  - 古典計算機で計算困難（NP困難）
  - イジング模型の最小エネルギーを求める問題に対応させることができる
- 量子コンピュータを使った組み合わせ最適化問題へのアプローチ
  - 量子アニーリング
    - 温度によ古典的なアニーリングを量子揺らぎを利用したアニーリングに拡張
    - D-Waveの実機で実行可能
  - QAOA
    - 量子ゲートによる近似的な時間発展を最適化
    - NISQの実機で実行可能